



Application Note AN-NIR-094

# Número de bromo en gasolina de pirólisis

## Determinación rápida del índice de bromo sin productos químicos

La gasolina de pirólisis (pygas) y sus fracciones destiladas a menudo contienen altos niveles de compuestos insaturados reactivos, haciéndolo inutilizable como combustible para motores. Además de la cantidad de diolefinas (determinada por el Diels-Alder método), también es necesario controlar la cantidad total de componentes olefínicos alifáticos. El método estándar cuantificar el grado de instauración (índice de bromo) en hidrocarburos insaturados es la titulación.

Este método químico húmedo requiere el enfriamiento de la muestra por debajo de 5 °C para minimizar las reacciones secundarias como la oxidación o sustitución. En contraste con el método primario, la espectroscopía de infrarrojo cercano (NIRS) no necesita muestra preparación y es capaz de determinar el índice de bromo en un minuto. La tecnología NIRS cumple con la norma ASTM normas D8321 y D6122.

## EQUIPO EXPERIMENTAL

Se analizaron 180 muestras de pygas en un Metrohm Analizador de líquidos DS2500 equipado con desechable viales de vidrio. Todas las mediciones se realizaron en modo de transmisión de 400 nm a 2500 nm. El control de temperatura se ajustó a 40 °C para proporcionar un entorno de muestra estable. Por razones de comodidad, viales de vidrio desechables con una longitud de paso de Se utilizaron 8 mm, lo que hizo un procedimiento de limpieza innecesario. Modelo de predicción y adquisición de datos El desarrollo se realizó con el software paquete Vision Air completo.



**Figure 1.** Analizador de líquidos DS2500.

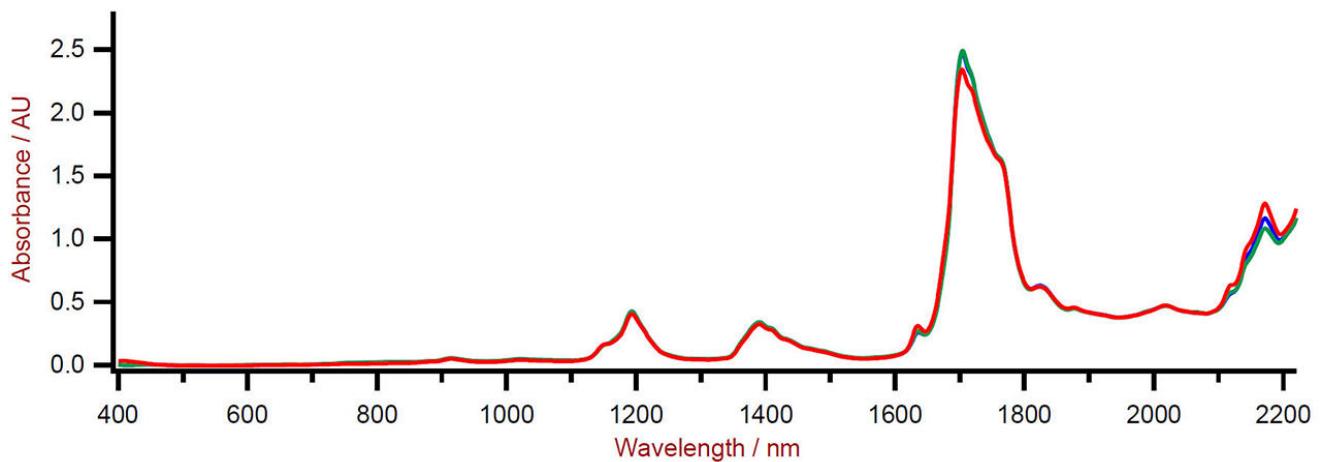
**Tabla 1.** Resumen de equipos de hardware y software.

Equipo	Número de metrohmios
Analizador de líquidos DS2500	2.929.0010
Viales desechables, 8 mm de diámetro, transmisión	6.7402.000
Vision Air 2.0 completo	6.6072.208

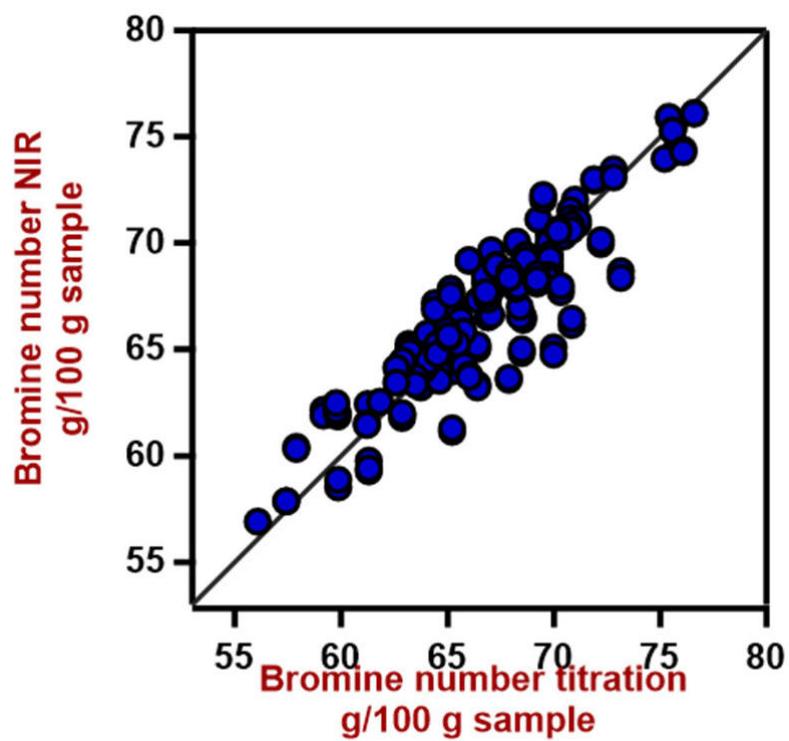
## RESULTADO

Los espectros Vis-NIR obtenidos (**Figura 2**) estaban acostumbrados a crear un modelo de predicción para el número de bromo determinación en pygas. Para verificar la calidad de la modelo de predicción, se

crearon diagramas de correlación que muestran la correlación entre Vis-NIR valores de predicción y métodos primarios. los respectivas cifras de mérito (FOM) se muestran en **figura 3**.



**Figure 2.** Selección de diferentes espectros Vis-NIR de gasolina de pirólisis obtenidos utilizando un analizador de líquidos DS2500 y viales desechables de 8 mm.



**Figure 3.** Diagrama de correlación para la predicción del número de bromo utilizando un analizador de líquidos DS2500.

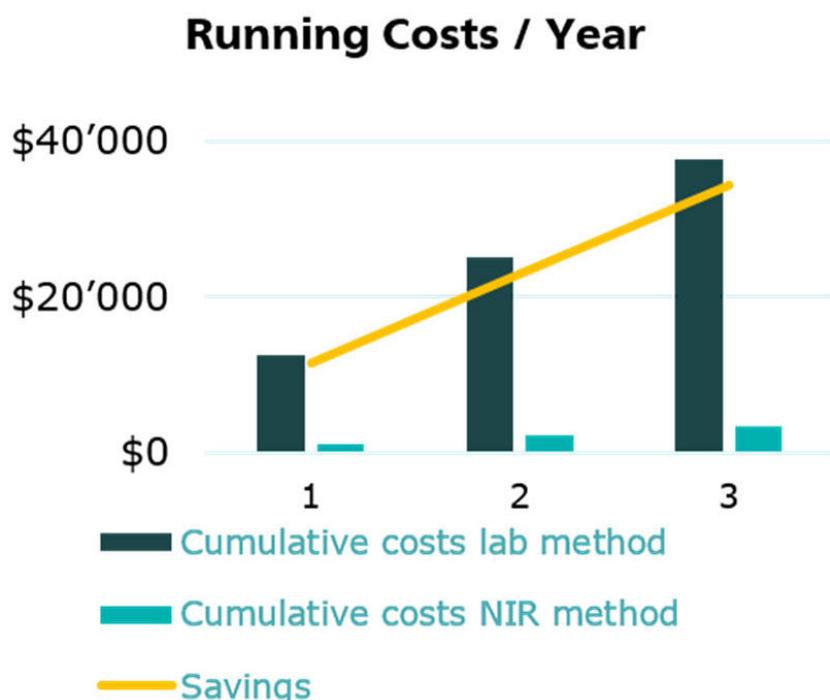
**Tabla 2.** Cifras de mérito para la predicción del índice de bromo utilizando un Analizador de Líquidos DS2500.

Figuras de merito	Valor
R <sup>2</sup>	0,836
Error estándar de calibración	1,84
Error estándar de validación cruzada	1,89

## CONCLUSIÓN

Esta nota de aplicación muestra la viabilidad de NIR espectroscopía para el análisis del número de bromo en gasolina de pirólisis. A diferencia del químico húmedo método utilizado en ASTM D1159 (Figura 4 y Tabla 3), sin muestra Se requiere preparación o

productos químicos con espectroscopía NIR. Además del número de bromo, se pueden determinar parámetros de calidad adicionales como el valor de dieno en el misma muestra con espectroscopía NIR.



**Figure 4.** Comparación de los costos de funcionamiento por año con el método de laboratorio de química húmeda convencional y NIRS.

**Tabla 3.** Comparación de costos y tiempo para obtener resultados (determinación de una sola vez) con el método de laboratorio de química húmeda convencional y NIRS.

	método de laboratorio	método NIR
Número de análisis (por día)	10	10
Costes de consumibles y productos químicos/medición	\$6	\$0,50
Tiempo empleado por medición	30 minutos	1 minuto
funcionamiento total costos / año	\$12533	\$1125

## CONTACT

Metrohm México  
Calle. Xicoténcatl #181, Col  
Del Carmen, Alcaldía  
Coyoacán.  
04100. Ciudad de México  
México

info@metrohm.mx



### DS2500 Liquid Analyzer

Sólida espectroscopía del infrarrojo cercano para control de calidad en el laboratorio y en el entorno de producción.

El DS2500 Liquid Analyzer es la solución probada y flexible para los análisis rutinarios de líquidos a lo largo de toda la cadena de producción. Su diseño robusto hace que el DS2500 Liquid Analyzer sea resistente al polvo, la humedad y las vibraciones, lo que hace que sea especialmente adecuado para el uso en entornos de producción adversos.

El DS2500 Liquid Analyzer cubre todo el rango espectral de 400 a 2500 nm, calienta las muestras hasta 80°C y es compatible con diferentes viales desechables y cubetas de cuarzo. El DS2500 Liquid Analyzer puede, por tanto, adaptarse a sus necesidades individuales de muestras y le ayuda a obtener resultados precisos y reproducibles en menos de un minuto. El reconocimiento integrado del portamuestras y el software intuitivo Vision Air garantizan además un funcionamiento fácil y seguro para el usuario.

En el caso de cantidades de muestra más grandes, la productividad se puede aumentar considerablemente utilizando una celda de flujo continuo en combinación con un robot de muestras Metrohm.



#### Vision Air 2.0 Complete

Vision Air - Software de espectroscopía universal.

Vision Air Complete es una solución de software moderna y fácil de usar para su empleo en entornos regulados.

Las ventajas de Vision Air son las siguientes:

- Aplicaciones de software individuales con interfaces de usuario personalizadas para garantizar un manejo intuitivo y fácil
- Fácil creación y mantenimiento de procedimientos operativos
- Base de datos SQL para una gestión de datos segura y sencilla

La versión Vision Air Complete (66072208) incluye todas las aplicaciones para el aseguramiento de la calidad mediante la espectroscopía Vis-NIR:

- Aplicación para la gestión de datos y aparatos
- Aplicación para el desarrollo de métodos
- Aplicación para análisis rutinarios

Más soluciones Vision Air Complete:

- 66072207 (Vision Air Network Complete)
- 66072209 (Vision Air Pharma Complete)
- 66072210 (Vision Air Pharma Network Complete)

#### DS2500 Soporte para viales desechables de 8 mm

Soporte inteligente para viales desechables de vidrio de 8 mm de diámetro

